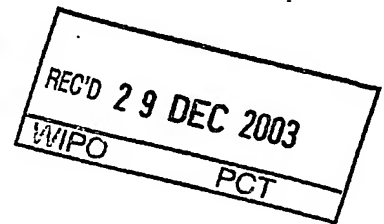


10/534849
Rec'd PCT/PTO 13 MAY 2005
PCT/EP 03/122

BUNDESREPUBLIK DEUTSCHLAND

**PRIORITY
DOCUMENT**
SUBMITTED OR TRANSMITTED IN
COMPLIANCE WITH RULE 17.1(a) OR (b)



Prioritätsbescheinigung über die Einreichung einer Patentanmeldung

Aktenzeichen:

102 53 610.4

Anmeldetag:

15. November 2002

Anmelder/Inhaber:

BAYER AKTIENGESELLSCHAFT,
Leverkusen/DE

Bezeichnung:

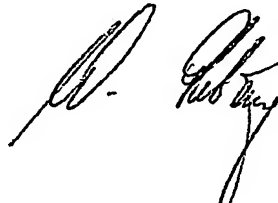
Optische Datenspeicher enthaltend ein
Co-Phthalocyanin mit einem axialen
Substituenten und einem axialen Liganden
in der mit Licht beschreibbaren Informationsschicht

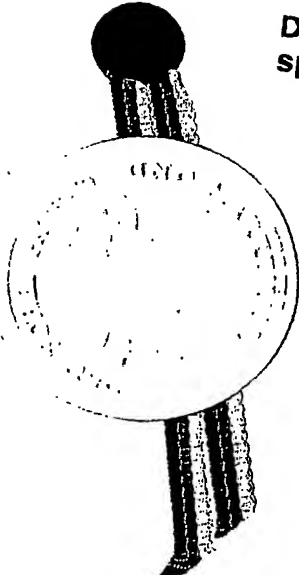
IPC:

G 11 B, C 07 F, C 09 B

Die angehefteten Stücke sind eine richtige und genaue Wiedergabe der ursprünglichen Unterlagen dieser Patentanmeldung.

München, den 04. September 2003
Deutsches Patent- und Markenamt
Der Präsident
Im Auftrag


Leitung



A 9161
09/00
EDV-L

BEST AVAILABLE COPY

Optische Datenspeicher enthaltend ein Co-Phthalocyanin mit einem axialen Substituenten und einem axialen Liganden in der mit Licht beschreibbaren Informationsschicht

5

Die vorliegende Erfindung betrifft die Verwendung von axial substituiertem Co-Phthalocyanin als lichtabsorbierende Verbindung in der mit Licht beschreibbaren Informationsschicht von einmal beschreibbaren optischen Datenträgern, optische Datenträger sowie ein Verfahren zu ihrer Herstellung.

10

Die einmal beschreibbare Compact Disk (CD-R) erlebt in letzter Zeit ein enormes Mengenwachstum. Dabei stellt die lichtabsorbierende Verbindung der Informationsschicht eine wesentliche Komponente des optischen Datenträgers dar, an die entsprechend hohe und vielfältige Anforderungen gestellt werden. Entsprechend aufwendig gestaltet sich nicht selten die Herstellung solcher Verbindungen (vgl. WO-A-02/080162).

15

Aufgabe der Erfindung ist demnach die Bereitstellung von weiteren lichtabsorbierenden Verbindungen für CD-R-Formate, insbesondere solche die möglichst ökologisch unbedenklich sind und einfach zu synthetisieren sind und die die hohen Anforderungen (wie Lichtstabilität, günstiges Signal-Rausch-Verhältnis, hohe Schreibempfindlichkeit, schadigungsfreies Aufbringen auf das Substratmaterial, u.ä.) für die Verwendung als lichtabsorbierende Verbindung in der als Informationsschicht eines einmal beschreibbaren optischen Datenträgers (vornehmlich CD-R) erfüllen.

20

25

Überraschenderweise wurde gefunden, dass Co-Phthalocyanine mit einem axialen Substituenten und einem axialen koordinativ gebundenen Liganden für den genannten Zweck gut geeignet sind.

30

Die vorliegende Erfindung betrifft daher optische Datenträger, die in ihrer Informationsschicht wenigstens eine lichtabsorbierende Verbindung enthalten, die

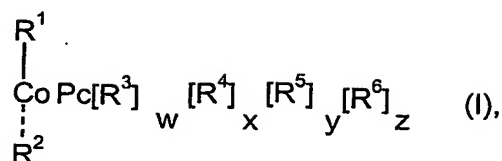
ein Co(III)-Phthalocyanin ist, wobei das Co-Metallzentrum einen axialen Substituenten R^1 und einen axialen koordiniert gebundenen Liganden R^2 trägt, wobei R^1 für CN, SCN, Halogen, insbesondere Cl, B oder F, Alkoxy, Aryloxy, Arylthio oder Alkylthio steht, und R^2 für keinen Liganden oder für gegebenenfalls substituiertes Amin, Wasser, Alkohol, H_2S , Thioalkohol oder für ein Isonitril steht.

Bevorzugt ist der optische Datenträger mit infrarotem Licht, vorzugsweise Laserlicht, insbesondere Licht mit einer Wellenlänge im Bereich von 750-800 nm, insbesondere 770-790 nm beschreibbar und lesbar.

Ebenfalls bevorzugt sind optische Datenträger, enthaltend ein vorzugsweise transparentes, gegebenenfalls schon mit einer oder mehreren Reflektionsschichten beschichtetes Substrat, auf dessen Oberfläche eine mit Licht beschreibbare Informationsschicht, gegebenenfalls eine oder mehrere Reflexionsschichten und gegebenenfalls eine Schutzschicht oder ein weiteres Substrat oder eine Abdeckung aufgebracht sind, der mit infrarotem Licht, vorzugsweise Laserlicht, besonders bevorzugt Licht mit einer Wellenlänge im Bereich von 750 - 800 nm, insbesondere 770 - 790 nm, beschrieben und gelesen werden kann, wobei die Informationsschicht eine lichtabsorbierende Verbindung und gegebenenfalls ein Bindemittel enthält, dadurch gekennzeichnet, dass als lichtabsorbierende Verbindung wenigstens ein Co(III)-Phthalocyanin verwendet wird, wobei das Co-Metallzentrum einen axialen Substituenten R^1 und einen axialen koordinativ gebundenen Liganden R^2 trägt, wobei R^1 für CN, SCN, Halogen, Alkoxy, Aryloxy, Arylthio oder Alkylthio steht und R^2 für keinen Liganden oder für $NR^{17}R^{18}R^{19}$, $OR^{10}R^{11}$, $SR^{10}R^{11}$ oder für ein

Isonitril der Formel $IC \equiv N^{\ominus} - R^{\oplus}$ steht, wobei die Substituenten die untenstehende Bedeutung besitzen.

Bevorzugt wird als lichtabsorbierende Verbindung ein Co-Phthalocyanin der Formel (I) eingesetzt



worin

CoPc für Kobalt-(III)-Phthalocyanin steht, wobei R^1 ein axialer Substituent des
 5 Kobalts und R^2 axialer, koordinativ gebundener Ligand des Kobalts ist, und
 die Reste R^3 bis R^6 Substituenten des Phthalocyanins entsprechen, worin

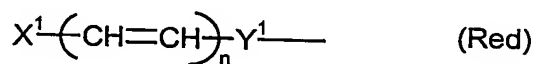
R^1 für CN, SCN, Halogen, Alkoxy, Aryloxy, Arylthio oder Alkylthio steht,
 R^2 für keinen Liganden oder für $\text{NR}^{17}\text{R}^{18}\text{R}^{19}$, $\text{OR}^{10}\text{R}^{11}$, $\text{SR}^{10}\text{R}^{11}$ oder für ein Isonitril

10 der Formel $\text{IC}\equiv\text{N}-\text{R}$ steht,

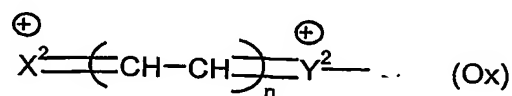
R^3 , R^4 , R^5 und R^6 unabhängig voneinander für Halogen, Cyano, Nitro, Alkyl, Aryl,
 15 Alkylamino, Dialkylamino, Alkoxy, Alkylthio, Aryloxy, Arylthio, SO_3H ,
 $\text{SO}_2\text{NR}^7\text{R}^8$, CO_2R^{12} , CONR^7R^8 , NH-COR^{12} oder einen Rest $-(\text{B})_m\text{-D}$
 stehen,

B ein Brückenglied aus der Gruppe direkte Bindung, CH_2 , CO, $\text{CH}(\text{Alkyl})$,
 20 $\text{C}(\text{Alkyl})_2$, NH, S, O oder $-\text{CH}=\text{CH}-$ bedeutet, wobei $(\text{B})_m$ eine chemisch
 sinnvolle Reihenfolge von Brückengliedern B bedeutet mit $m = 1$ bis 10,
 vorzugsweise ist $m = 1, 2, 3$ oder 4,

D für den monovalenten Rest eines Redoxsystems der Formel



25 oder



oder für einen Metallocenylrest oder Metallocenylcarbonylrest steht, wobei als Metallzentrum Titan, Mangan, Eisen, Ruthenium oder Osmium in Frage kommt,

5

X^1 und X^2 unabhängig voneinander für $NR'R''$, OR'' oder SR'' stehen,

Y^1 für NR' , O oder S steht, Y^2 für NR' steht,

10

n für 1 bis 10 steht und

R' und R'' unabhängig voneinander für Wasserstoff, Alkyl, Cycloalkyl, Aryl oder Hetaryl stehen, oder eine direkte Bindung oder eine Brücke zu einem der C-

Atome der $-(CH=CH)_n$ bzw. $-(CH-CH)_n$ Kette bilden,

15

w, x, y und z unabhängig voneinander für 0 bis 4 stehen und $w+x+y+z \leq 12$ sind,

R für Alkyl oder Aryl steht

20

R^7 und R^8 unabhängig voneinander für Wasserstoff, Alkyl, Aryl oder R^7 und R^8 gemeinsam mit dem N-Atom, an das sie gebunden sind, einen heterocyclischen 5-, 6- oder 7-gliedrigen Ring bilden, gegebenenfalls unter Beteiligung weiterer Heteroatome, insbesondere aus der Gruppe O, N und S, wobei NR^7R^8 , insbesondere für Pyrrolidino, Piperidino oder Morpholino stehen,

25

R^{10} und R^{11} unabhängig voneinander für Wasserstoff, Alkyl, Aryl oder R^{10} und R^{11} gemeinsam mit dem O- oder S-Atom, an das sie gebunden sind, einen aromatischen, quasi-aromatischen, teil- oder perhydrierten heterocyclischen

5-, 6- oder 7-gliedrigen Ring bilden, gegebenenfalls unter Beteiligung weiterer Heteroatome, insbesondere aus der Gruppe O, N und S, stehen

R^{12} für Alkyl, Aryl, Hetaryl oder Wasserstoff steht,

5

R^{17} , R^{18} und R^{19} unabhängig voneinander für Wasserstoff, Alkyl, Aryl, Hetaryl oder NR^{17} R^{18} R^{19} für einen aromatischen, quasi-aromatischen, teil- oder perhydrierten heterocyclischen 5-, 6- oder 7-gliedrigen Ring stehen, gegebenenfalls unter Beteiligung weiterer Heteroatome, insbesondere aus der Gruppe O, N und S,

10

Die Alkyl-, Alkoxy-, Aryl- und heterocyclischen Reste können gegebenenfalls weitere Reste wie Halogen, Hydroxy, Hydroxyalkyl, Amino, Alkylamino, Dialkylamino, Nitro, Cyano, $CO-NH_2$, Alkoxycarbonyl, Morpholino, Piperidino, Pyrrolidino, Pyrrolidono, Trialkylsilyl oder Trialkylsiloxo tragen. Die Alkyl- und Alkoxyreste können zusätzlich auch Arylreste tragen und die Arylreste können zusätzlich auch Alkyl- oder Alkoxyreste tragen. Die Alkyl- und Alkoxyreste können gesättigt, ungesättigt, geradkettig oder verzweigt sein können, die Alkylreste können teil- oder perhalogeniert sein, die Alkyl- und Alkoxyreste können ethoxyliert oder propoxyliert oder silyliert sein. Benachbarte Alkyl und/oder Alkoxyreste an Aryl- oder heterocyclischen Resten können gemeinsam eine drei- oder viergliedrige Brücke ausbilden können.

15

20

Bevorzugt sind Verbindungen der Formel (I), worin für die Reste R^1 bis R^8 und R , R' , R'' und R^9 bis R^{12} und R^{17} bis R^{19} :

25

Substituenten mit der Bezeichnung „Alkyl“ vorzugsweise C_1 - C_{16} -Alkyl, insbesondere C_1 - C_6 -Alkyl bedeuten, die gegebenenfalls durch Halogen, wie Chlor, Brom, Fluor, Hydroxy, Cyano und/oder C_1 - C_6 -Alkoxy substituiert sind;

30

Substituenten mit der Bezeichnung „Alkoxy“ vorzugsweise C₁-C₁₆-Alkoxy, insbesondere C₁-C₆-Alkoxy bedeuten, die gegebenenfalls durch Halogen, wie Chlor, Brom, Fluor, Hydroxy, Cyano und/oder C₁-C₆-Alkyl substituiert sind;

5 Substituenten mit der Bezeichnung „Cycloalkyl“ vorzugsweise C₄-C₈-Cycloalkyl, insbesondere C₅ bis C₆-Cycloalkyl bedeuten, die gegebenenfalls durch Halogen, wie Chlor, Brom oder Fluor, Hydroxy, Cyano und/oder C₁-C₆-Alkyl substituiert sind.

10 Substituenten mit der Bezeichnung „Alkenyl“ vorzugsweise C₆-C₈-Alkenyl bedeuten, die gegebenenfalls durch Halogen, wie Chlor, Brom oder Fluor, Hydroxy, Cyano und/oder C₁-C₆-Alkyl substituiert sind, insbesondere bedeutet Alkenyl Allyl,

15 Substituenten mit der Bedeutung „Hetaryl“ vorzugsweise für heterocyclische Reste mit 5- bis 7-gliedrigen Ringen, die vorzugsweise Heteroatome aus der Gruppe N, S und/oder O enthalten und gegebenenfalls mit aromatischen Ringen anelliert sind oder gegebenenfalls weitere Substituenten tragen beispielsweise Halogen, Hydroxy, Cyano und/oder Alkyl, wobei besonders bevorzugt sind: Pyridyl, Furyl, Thienyl, Oxazolyl, Thiazolyl, Imidazolyl, Chinolyl, Benzoxazolyl, Benzthiazolyl und Benzimidazolyl,

20 Die Substituenten mit der Bezeichnung „Aryl“ vorzugsweise C₆-C₁₀-Aryl, insbesondere Phenyl oder Naphthyl bedeuten, die gegebenenfalls durch Halogen, wie F, Cl, Hydroxy, C₁-C₆-Alkyl, C₁-C₆-Alkoxy, NO₂ und/oder CN substituiert sind.

25 Bevorzugt werden Co-Phthalocyanine der Formel (I), worin

R¹ für CN, SCN, Chlor, Fluor, Brom, Iod, Alkoxy oder Alkylthio steht

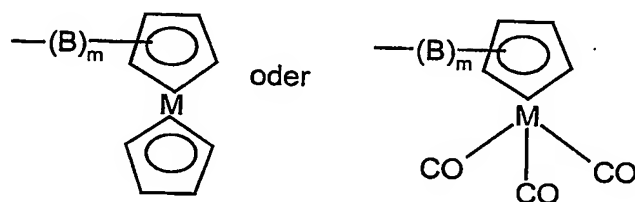
R² für keinen Liganden oder für NR¹⁷R¹⁸R¹⁹, OR¹⁰R¹¹, SR¹⁰R¹¹ oder für ein Isonitril

30 der Formel $\text{IC}\equiv\overset{\ominus}{\text{N}}-\overset{\oplus}{\text{N}}-\text{R}$ steht,

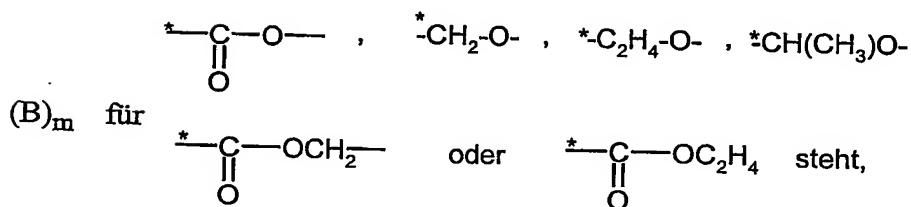
R für Methyl, Ethyl, Propyl, Isopropyl, Butyl, Isobutyl, tert. Butyl, Pentyl, tert. Amyl, Hydroxyethyl, 3-Dimethylaminopropyl, 3-Diethylaminopropyl, Phenyl, p-tert.-Butylphenyl, p-Methoxyphenyl, Isopropylphenyl, Trifluormethylphenyl,
5 Baenzyl oder Naphthyl steht,

R³, R⁴, R⁵ und R⁶ unabhängig voneinander für Chlor, Fluor, Brom, Iod, Cyano,
Nitro, Methyl, Ethyl, Propyl, Isopropyl, Butyl, Isobutyl, tert. Butyl, Pentyl,
tert. Amyl, Hydroxyethyl, 3-Dimethylaminopropyl, 3-Diethylaminopropyl,
10 Phenyl, p-tert.-Butylphenyl, p-Methoxyphenyl, Isopropylphenyl, Trifluor-
methylphenyl, Naphthyl, Methylamino, Ethylamino, Propylamino,
Isopropylamino, Butylamino, Isobutylamino, tert. Butylamino, Pentylamino,
tert. Amylamino, Benzylamino, Methylphenylhexylamino, Hydroxy-
ethylamino, Aminopropylamino, Aminoethylamino, 3-Dimethylamino-
15 propylamino, 3-Diethylaminopropylamino, Diethylaminoethylamino, Di-
butylaminopropylamino, Morpholinopropylamino, Piperidinopropylamino,
Pyrrolidinopropylamino, Pyrrolidonopropylamino, 3-(Methyl-Hydroxyethyl-
amino)propylamino, Methoxyethylamino, Ethoxyethylamino, Methoxy-
propylamino, Ethoxypropylamino, Methoxyethoxypropylamino, 3-(2-Ethyl-
20 hexyloxy)propylamino, Isopropoxypropylamino, Dimethylamino, Diethyl-
amino, Diethanolamino, Dipropylamino, Diisopropylamino, Dibutylamino,
Diisobutylamino, Di-tert. butylamino, Dipentylamino, Di-tert. amylamino,
Bis(2-Ethylhexyl)amino, Bis(aminopropyl)amino, Bis(aminoethyl)amino,
Bis(3-Dimethylaminopropyl)amino, Bis(3-Diethylaminopropyl)amino, Bis-
25 (Diethylaminoethyl)amino, Bis(dibutylaminopropyl)amino, Di(morpholino-
propyl)amino, Di(piperidinopropyl)amino, Di(pyrrolidinopropyl)amino, Di-
(pyrrolidonopropyl)amino, Bis(3-(Methyl-hydroxyethylamino)propyl)amino,
Dimethoxyethylamino, Diethoxyethylamino, Dimethoxypropylamino, Di-
ethoxypropylamino, Di(methoxyethoxyethyl)amino, Di(methoxyethoxy-
30 propyl)amino, Bis(3-(2-Ethylhexyloxy)propyl)amino, Di(isopropoxyiso-
propyl)amino, Methoxy, Ethoxy, Propyloxy, Isopropoxy, Butyloxy,

5 Isobutyloxy, tert. Butyloxy, Pentyloxy, tert. Amyloxy, 3-(2,4-Dimethyl)-
pentoxy, Methoxyethoxy, Ethoxyethoxy, Methoxypropyloxy, Ethoxy-
propyloxy, Methoxyethoxypropyloxy, 3-(2-Ethylhexyloxy)propyloxy,
Methylthio, Ethylthio, Propylthio, Isopropylthio, Butylthio, Isobutylthio,
tert.-Butylthio, Pentythio, tert.-Amylthio, Phenyl, Methoxyphenyl, Trifluor-
methylphenyl, Naphthyl, CO_2R^{12} , CONR^7R^8 , NH-COR^{12} , SO_3H ,
 $\text{SO}_2\text{NR}^7\text{R}^8$, oder für einen Rest der Formel



worin



15 wobei der Stern (*) die Anknüpfung mit dem 5-Ring anzeigt,

M für ein Mn oder Fe steht,

w, x, y und z unabhängig voneinander für 0 bis 4 stehen und $w+x+y+z \leq 12$ sind,

20 NR^7R^8 für Amino, Methylamino, Ethylamino, Propylamino, Isopropylamino, Butyl-
amino, Isobutylamino, tert. Butylamino, Pentyamino, tert. Amylamino, Ben-
zylamino, Methylphenylhexylamino, 2-Ethyl-1-hexylamino, Hydroxyethyl-
amino, Aminopropylamino, Aminoethylamino, 3-Dimethylaminopropyl-

amino, 3-Diethylaminopropylamino, Morpholinopropylamino, Piperidino-
 propylamino, Pyrrolidinopropylamino, Pyrrolidonopropylamino, 3-(Methyl-
 Hydroxyethylamino)propylamino, Methoxyethylamino, Ethoxyethylamino,
 Methoxypropylamino, Ethoxypropylamino, Methoxyethoxypropylamino, 3-
 (2-Ethylhexyloxy)propylamino, Isopropyloxyisopropylamino, Dimethyl-
 amino, Diethylamino, Dipropylamino, Diisopropylamino, Dibutylamino,
 Diisobutylamino, Di-tert. butylamino, Dipentylamino, Di-tert. Amylamino,
 Bis(2-Ethylhexyl)amino, Dihydroxyethylamino, Bis(aminopropyl)amino,
 Bis(aminoethyl)amino, Bis(3-Dimethylaminopropyl)amino, Bis(3-Diethyl-
 aminopropyl)amino, Di(morpholinopropyl)amino, Di(piperidinopropyl)ami-
 no, Di(pyrrolidinopropyl)amino, Di(pyrrolidonopropyl)amino, Bis(3-(Me-
 thyl-Hydroxyethylamino)propyl)amino, Dimethoxyethylamino, Diethoxy-
 ethylamino, Dimethoxypropylamino, Diethoxypropylamino, Di(methoxy-
 ethoxypropyl)amino, Bis(3-(2-Ethylhexyloxy)propyl)amino, Di(isopropyl-
 oxyisopropyl)amino, Anilino, p-Toluidino, p-tert. Butylanilino, p-Anisidino,
 Isopropylanilino oder Naphtylamino stehen oder NR^7R^8 für Pyrrolidino, Pipe-
 ridino, Piperazino oder Morpholino stehen,

R^{12} für Wasserstoff, Methyl, Ethyl, Propyl, Isopropyl, Butyl, Isobutyl, ter.-Butyl,
 Pentyl, tert.-Amyl, Phenyl, p-tert.-Butylphenyl, p-Methoxyphenyl, Isopropyl-
 phenyl, p-Trifluormethylphenyl, Cyanophenyl, Naphthyl, 4-Pyridinyl, 2-
 Pyridinyl, 2-Chinolinyl, 2-Pyrrolyl oder 2-Indolyl steht,

$\text{NR}^{17}\text{R}^{18}\text{R}^{19}$ für Amoniak, Methylamin, Ethylamin, Propylamin, Isopropylamin,
 Butylamin, Isobutylamin, tert. Butylamin, Pentylamin, tert. Amylamin, Ben-
 zylamin, Methylphenylhexylamin, 2-Ethyl-1-hexylamin, Hydroxyethylamin,
 Aminopropylamin, Aminoethylamin, 3-Dimethylaminopropylamin, 3-
 Diethylaminopropylamin, Morpholinopropylamin, Piperidinopropylamin,
 Pyrrolidinopropylamin, Pyrrolidonopropylamin, 3-(Methyl-Hydroxyethyl-
 amino)propylamin, Methoxyethylamin, Ethoxyethylamino, Methoxypropyl-
 amin, Ethoxypropylamin, Methoxyethoxypropylamin, 3-(2-Ethylhexyl-

oxy)propylamin, Isopropoxyisopropylamin, Dimethylamin, Diethylamin, Dipropylamin, Diisopropylamin, Dibutylamin, Diisobutylamin, Di-tert. butylamin, Dipentylamin, Di-tert. Amylamin, Bis(2-Ethylhexyl)amin, Dihydroxyethylamin, Bis(aminopropyl)amin, Bis(aminoethyl)amin, Bis(3-Dimethylaminopropyl)amin, Bis(3-Diethylaminopropyl)amin, Di(morpholinopropyl)amin, Di(piperidinopropyl)amin, Di(pyrrolidinopropyl)amin, Di(pyrrolidonopropyl)amin, Bis(3-(Methyl-Hydroxyethylamino)propyl)amin, Dimethoxyethylamin, Diethoxyethylamin, Dimethoxypropylamin, Diethoxypropylamin, Di(methoxyethoxypropyl)amin, Bis(3-(2-Ethylhexyloxy)propyl)amino, Di(isopropoxyisopropyl)amin, Trimethylamin, Triethylamin, Tripropylamin, Triisopropylamin, Tributylamin, Triisobutylamin, Tri-tert. butylamin, Tripentylamin, Tri-tert. Amylamin, Tris(2-Ethylhexyl)amin, Trihydroxyethylamin, Tris(aminopropyl)amin, Tris(aminoethyl)amin, Tris(3-Dimethylaminopropyl)amin, Tris(3-Diethylaminopropyl)amin, Tri(morpholinopropyl)amin, Tri(piperidinopropyl)amin, Tri(pyrrolidinopropyl)amin, Tri(pyrrolidonopropyl)amin, Tris(3-(Methyl-Hydroxyethylamino)propyl)amin, Trimethoxyethylamin, Triethoxyethylamin, Trimethoxypropylamin, Triethoxypropylamin, Tri(methoxyethoxypropyl)amin, Tris(3-(2-Ethylhexyloxy)propyl)amino, Tri(isopropoxyisopropyl)amin, Anilin, p-Toluidin, p-tert. Butylanilin, p- Anisidin, Isopropylanilin, Naphtylamin, Pyridin, Pyridazin, Pyrimidin, Pyrazin, Triazin, Oxazin, Pyrrol, Pyrazol, Imidazol, Chinolin, Pyrrolidin, Piperidin, Piperazin oder Morphin stehen,

OR¹⁰R¹¹ für Wasser, Methanol, Ethanol, Propanol, Isopropanol, Butanol, Isobutanol, tert. Butanol, Pentanol, tert. Amylalkohol, 3-(2,4-Dimethyl)-pentanol, Methoxyethanol, Ethoxyethanol, Methoxypropanol, Ethoxypropanol, Methoxyethoxypropanol, 3-(2-Ethylhexyloxy)propanol, Diacetonalkohol, Phenol, Tetrahydrofuran, Furan oder Oxazol stehen

SR¹⁰R¹¹ für Schwefelwasserstoff, Methylthiol, Ethylthiol, Propylthiol, Isopropylthiol, Butylthiol, Isobutylthiol, tert. Buylthiol, Pentylthiol, tert. Amylthiol, 3-

(2,4-Dimethyl)-pentylthiol, Methoxyethylthiol, Ethoxyethylthiol, Methoxypropylthiol, Ethoxypropylthiol, Methoxyethoxypropylthiol, 3-(2-Ethylhexyloxy)propylthiol, Diacetonathiol, Thiophenol, Tetrahydrothiofuran, Thiofuran oder Oxathiazol stehen

5

wobei

10

die Alkyl-, Alkoxy-, Aryl- und heterocyclischen Reste gegebenenfalls weitere Reste wie Alkyl, Halogen, Hydroxy, Hydroxyalkyl, Amino, Alkylamino, Dialkylamino, Nitro, Cyano, CO-NH₂, Alkoxy, Alkoxycarbonyl, Morpholino, Piperidino, Pyrrolidino, Pyrrolidono, Trialkylsilyl, Trialkylsiloxo oder Phenyl tragen können, die Alkyl- und/oder Alkoxyreste gesättigt, ungesättigt, geradkettig oder verzweigt sein können, die Alkylreste teil- oder perhalogeniert sein können, die Alkyl- und/oder Alkoxyreste ethoxyliert oder propoxyliert oder silyliert sein können, benachbarte Alkyl und/oder

15

Alkoxyreste an Aryl- oder heterocyclischen Resten gemeinsam eine drei- oder viergliedrige Brücke ausbilden können.

20

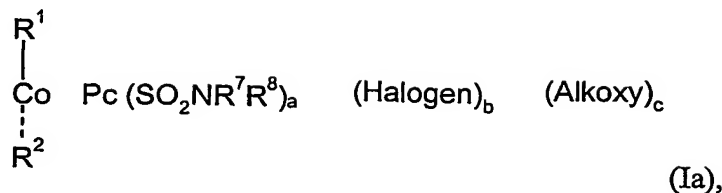
Unter Redoxsystemen im Rahmen dieser Anmeldung werden insbesondere die in der Angew. Chem. 1978, S. 927 und in Topics of Current Chemistry, Vol. 92, S. 1 (1980), beschriebenen Redoxsystemen verstanden.

Bevorzugt sind p-Phenylendiamine, Phenothiazine, Dihydrophenazine, Bipyridiniumsalze (Viologene), Chinodimethane.

25

Bevorzugt sind dies Co-Phthalocyanine der Formel (I), worin die Summe aus w, x, y und z größer Null ist, vorzugsweise eine Zahl von 1 bis 12 bedeutet.

Ganz besonders bevorzugt sind erfindungsgemäße Verbindungen der Formel Ia



worin

Halogen für Chlor, Brom oder Fluor steht,

5

Alkoxy für C₁-C₈-Alkoxy steht, das gegebenenfalls substituiert ist, und a eine Zahl von 0 bis 4, b eine Zahl von 0 bis 10, c eine Zahl von 0 bis 8 bedeutet, wobei die Summe aus a, b und c ≤ 12 ist und

10 R¹, R², R⁷, R⁸, und CoPc die obige Bedeutung besitzen.

Die Erfindung betrifft weiterhin Verbindungen der Formel (Ia), worin die jeweiligen Substituenten die oben angegebenen Bedeutungen besitzen.

15 Die Erfindung betrifft auch ein Verfahren zur Herstellung von Verbindungen der Formel (Ia), das dadurch gekennzeichnet ist, dass man gegebenenfalls substituiertes Co-Phthalocyanin oxidiert, anschließend mit KatCN, KatSCN, Kathalogenid, Katalkoxy oder Katalkylthio umsetzt und gegebenenfalls weiter mit NR¹⁷R¹⁸R¹⁹,

20 OR¹⁰R¹¹, SR¹⁰R¹¹ oder einem Isonitril der Formel $\text{IC}\equiv\text{N}-\text{R}$ bei einer Temperatur von 30-100°C, insbesondere bei 40-70°C, umsetzt

wobei

R¹⁷, R¹⁸, R¹⁹, R¹⁰, R¹¹, und R die obige Bedeutung besitzen und

25

Kat für Lithiumkation, Natriumkation, Kaliumkation, Tetrabutylammoniumkation, Tetrapropylammoniumkation, Tetraethylammoniumkation, Tetramethylammoniumkation, Triethyloxoniumkation, Triphenylcarbonikum-

kation, Diphenyliodoniumkation, N-Ethylpyridiniumkation oder Ferrocen-
kation steht.

5 Bevorzugt erfolgt die Einführung der axialen Substituenten unter oxidativen Be-
dingungen, z.B. Chlor oder Luft, vorzugsweise Luft, im Falle von Luft in Gegenwart
von überschüssigem KatCN, KatSCN, Katalkoxy oder Katalkylthio und die optionale
Einführung der weiteren axialen Liganden mit $\text{NR}^{17}\text{R}^{18}\text{R}^{19}$, $\text{OR}^{10}\text{R}^{11}$, $\text{SR}^{10}\text{R}^{11}$ oder
einem Isonitril der Formel $\text{IC}\equiv\text{N}-\text{R}$ bei einer Temperatur von 20-80°C,
insbesondere bei 40-60°C.

10

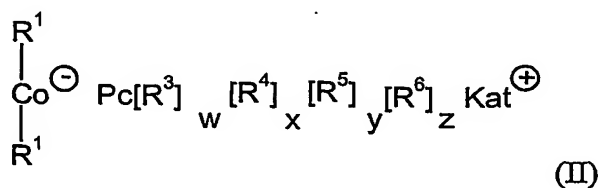
Die Erfindung betrifft weiterhin Mischungen, enthaltend wenigstens 1-50 Gew.%,
vorzugsweise mehr als 80 Gew.%, insbesondere mehr als 90 Gew.% eines Co(III)-
Phthalocyanin der Formel I mit einem axialen Substituenten R^1 , und einem axialen
Liganden R^2 , wobei R^1 für CN, SCN, Halogen, Alkoxy, Aryloxy, Arylthio oder
15 Alkylthio steht, und

15

R^2 für keinen Liganden oder für $\text{NR}^{17}\text{R}^{18}\text{R}^{19}$, $\text{OR}^{10}\text{R}^{11}$, $\text{SR}^{10}\text{R}^{11}$ oder für ein
Isonitril der Formel $\text{IC}\equiv\text{N}-\text{R}$ steht.

20

Bevorzugt ist ein weiterer Teil der Mischung ein von der Formel I verschiedenes
Phthalocyanin. Insbesondere ist dies ein Phthalocyanin der Formel II.



25

wobei R^1 , R^3 , R^4 , R^5 , R^6 w, x, y, z und CoPc die obige Bedeutung besitzen und

5 Kat+ für Lithiumkation, Natriumkation, Kaliumkation, Tetrabutylammoniumkation, Tetrapropylammoniumkation, Tetraethylammoniumkation, Tetramethylammoniumkation, Triethyloxoniumkation, Triphenylcarboniumkation, Diphenyliodoniumkation, N-Ethylpyridiniumkation oder Ferrocenkation steht.

Besonders bevorzugt besitzt die Mischung 0 bis 50 Gew.% des Farbstoffes der Formel (II), insbesondere 0 bis 20% vorzugsweise weniger als 10 Gew.%

10 Besonders bevorzugt stellen mehr als 95 Gew.%, insbesondere mehr als 98 Gew.% der Mischung die beiden Farbstoffe I und II.

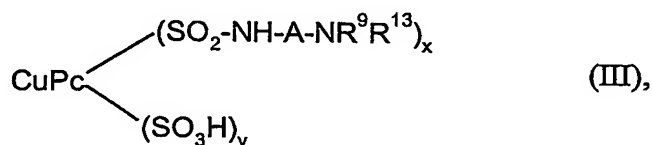
15 Besonders bevorzugt enthält die mit Licht beschreibbare Informationsschicht als lichtabsorbierende Verbindungen neben einer wie oben beschriebenen Co(III)-Phthalocyanin-Verbindung, insbesondere eine der Formel I zusätzlich noch wenigstens ein anderes gegebenenfalls substituiertes Phthalocyanin mit oder ohne Zentralatom. Als Zentralatom kommt dafür beispielsweise eines aus der Gruppe Si, Zn, Al, Cu, Pd, Pt, Au und Ag, insbesondere Cu und Pd in Frage.

20 Die Erfindung betrifft auch Mischungen enthaltend:

- 25
- a) ein Co(III)-Phthalocyanin der Formel I mit einem axialen Substituenten R^1 , und einem axialen Liganden R^2 ,
 - b) ein von a) verschiedenes Phthalocyanin, insbesondere ein von Co-freies Phthalocyanin

Für die Komponenten a) und b) kommen bevorzugt die jeweils oben angegebenen bevorzugten Ausführungsformen in Frage.

Besonders bevorzugt sind als Komponente b) beispielsweise die aus DE-A 19 925 712 bekannten sulfonamidsubstituierten Cu-Phthalocyane. Besonders bevorzugt sind solche der Formel III



5

worin

CuPc für einen Kupferphthalocyanin-Rest steht,

10

A für ein gegebenenfalls substituiertes geradkettiges oder verzweigtes C₂-C₆-Alkylen wie z.B. Ethylen, Propylen, Butylen, Pentylen, Hexylen steht,

15

R⁹ und R¹³ unabhängig voneinander für Wasserstoff oder jeweils gegebenenfalls substituiertes geradkettiges oder verzweigtes C₁-C₆-Alkyl wie z.B. Methyl, Ethyl, Propyl, Butyl, Pentyl, Hexyl, insbesondere für substituiertes C₁-C₆-Hydroxyalkyl sowie für unsubstituiertes C₁-C₆-Alkyl stehen,

20

oder R⁹ und R¹³ zusammen mit dem N-Atom, an das sie gebunden sind, einen heterocyclischen 5- oder 6-Ring bilden, der gegebenenfalls ein weiteres Heteroatom, z.B. S, N oder O enthält,

x

für 2,0 bis 4,0 steht,

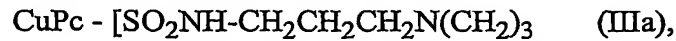
25

y

für 0 bis 1,5 steht und

die Summe von x und y 2,0 bis 4,0, bevorzugt 2,5 bis 4,0 beträgt.

Besonders bevorzugt eignen sich als Mischungskomponente c) solche Verbindungen der Formel (III), die der Formel (IIIa) entsprechen



5 worin

CuPc Kupfer-Phthalocyanin bedeutet.

10 Als weitere bevorzugte zusätzliche lichtabsorbierende Verbindungen eignen sich die Sulfonamid- bzw. Amido-substituierten Phthalocyanine wie sie beispielsweise aus EP-A-519 395 bekannt sind.

15 Bevorzugt beträgt im Falle von Mischungen verschiedener lichtabsorbierender Verbindungen der Anteil der Verbindungen der Formel (I) davon 10 bis 90 Gew.-%.

Besonders bevorzugt ist eine Mischung der Formeln (I) und (III) in einem Gewichtsverhältnis von 10:90 bis 90:10, bevorzugt 20:80 bis 80:20, besonders bevorzugt von 40:60 bis 60:40.

20 Die Informationsschicht kann neben der lichtabsorbierenden Verbindung noch Binder, Netzmittel, Stabilisatoren, Verdünner und Sensibilisatoren sowie weitere Bestandteile enthalten.

25 Die Substrate können aus optisch transparenten Kunststoffen hergestellt sein, die, wenn notwendig, eine Oberflächenbehandlung erfahren haben. Bevorzugte Kunststoffe sind Polycarbonate und Polyacrylate, sowie Polycycloolefine oder Polyolefine.

30 Die Reflektionsschicht kann aus jedem Metall bzw. Metallegierung, die üblicherweise für beschreibbare optische Datenträger benutzt werden, hergestellt sein. Geeignete Metalle bzw. Metallegierungen können aufgedampft und gesputtert wer-

den und enthalten z.B. Gold, Silber, Kupfer, Aluminium und deren Legierungen untereinander oder mit anderen Metallen.

5 Die mögliche Schutzschicht über der Reflektionsschicht kann aus UV-härtenden Acrylaten bestehen.

Eine mögliche Zwischenschicht, die die Reflektionsschicht beispielsweise vor Oxidation schützt, kann ebenfalls vorhanden sein.

10 Die Erfindung betrifft weiterhin ein Verfahren zur Herstellung der erfindungsgemäßen optischen Datenspeicher, dadurch gekennzeichnet, dass man ein Co(III)-Phthalocyanin, wobei das Co-Metallzentrum einen axialen Substituenten R^1 und einen axialen koordiniert gebundenen Liganden R^2 trägt, wobei R^1 für CN, SCN, Halogen, insbesondere Cl, B oder F, Alkoxy, Aryloxy, Arylthio oder Alkylthio steht, und R^2 für keinen Liganden oder für gegebenenfalls substituiertes Amin, Wasser, Alkohol, H_2S , Thioalkohol oder für ein Isonitril steht, als lichtabsorbierende Verbindung auf das Substrat des optischen Datenträgers aufträgt.

20 Bevorzugt ist ein Verfahren zur Herstellung der erfindungsgemäßen optischen Datenträger, das dadurch gekennzeichnet ist, dass man auf ein transparentes Substrat, die mit Licht beschreibbare Informationsschicht durch Beschichten mit wenigstens einem Co-Phthalocyaninkomplex der Formel I, gegebenenfalls in Kombination mit anderen lichtabsorbierenden Verbindungen, insbesondere solche der Komponente b), geeigneten Bindern, Additiven und Lösungsmitteln aufbringt und weiter gegebenenfalls mit einer Reflexionsschicht, gegebenenfalls weiteren Zwischenschichten und gegebenenfalls einer Schutzschicht versieht.

25 Die Beschichtung des Substrates mit der lichtabsorbierenden Verbindung der Formel I gegebenenfalls in Kombination mit weiteren Farbstoffen, Bindern und/oder Lösungsmitteln erfolgt vorzugsweise durch Spin Coating oder Sputtern.

Für das Coating wird die lichtabsorbierende Verbindung insbesondere die der Formel I vorzugsweise mit oder ohne Additive in einem geeigneten Lösungsmittel oder Lösungsmittelgemisch gelöst, so dass die Verbindung, insbesondere die der Formel I 100 oder weniger, beispielsweise 10 bis 20 Gewichtsanteile auf 100 Gewichtsanteile Lösungsmittel ausmacht. Die beschreibbare Informationsschicht wird danach vorzugsweise bei reduziertem Druck durch Sputtern oder Aufdampfen metallisiert (Reflexionsschicht) und eventuell anschließend mit einem Schutzlack (Schutzschicht) oder einem weiteren Substrat oder einer Abdeckschicht versehen. Mehrschichtige Anordnungen mit teiltransparenter Reflektionsschicht sind auch möglich.

Lösungsmittel bzw. Lösungsmittelgemische für das Beschichten der lichtabsorbierenden Verbindungen der Formel I oder ihrer Mischungen mit Additiven und/oder Bindemitteln sowie anderen lichtabsorbierenden Verbindungen werden einerseits nach ihrem Lösungsvermögen für die lichtabsorbierende Verbindung, insbesondere die der Formel I und die anderen Zusätze und andererseits nach einem minimalen Einfluss auf das Substrat ausgewählt. Geeignete Lösungsmittel, die einen geringen Einfluss auf das Substrat haben, sind beispielsweise Alkohole, Ether, Kohlenwasserstoffe, halogenierte Kohlenwasserstoffe, Alkoxyalkohole, Ketone. Beispiele solcher Lösungsmittel sind Methanol, Ethanol, Propanol, 2,2,3,3-Tetrafluorpropanol, Butanol, Diacetonalkohol, Benzylalkohol, Tetrachloroethan, Dichlormethan, Diethylether, Dipropylether, Dibutylether, Methyl-tert.-butylether, Methoxyethanol, Ethoxyethanol, 1-Methyl-2-propanol, Methylethylketon, 4-Hydroxy-4-methyl-2-pentanon, Hexan, Cyclohexan, Ethylcyclohexan, Octan, Benzol, Toluol, Xylol. Bevorzugte Lösungsmittel sind Kohlenwasserstoffe und Alkohole, da sie den geringsten Einfluß auf das Substrat ausüben. Besonders bevorzugt sind Propanol, 2,2,3,3-Tetrafluorpropanol, Butanol und Mischungen von diesen Alkoholen mit Diacetonalkohol, Insbesondere Propanol/Diacetonalkohol 80-100%/0-20%.

Geeignete Additive für die beschreibbare Informationsschicht sind Stabilisatoren, Netzmittel, Binder, Verdünner und Sensibilisatoren.

Die lichtabsorbierende Verbindung sollte vorzugsweise thermisch veränderbar sein. Vorzugsweise erfolgt die thermische Veränderung bei einer Temperatur $<600^{\circ}\text{C}$. Eine solche Veränderung kann beispielsweise eine Zersetzung oder chemische Veränderung des chromophoren Zentrums der lichtabsorbierenden Verbindung sein.

5

Der optische Datenspeicher kann neben der Informationsschicht weitere Schichten wie Metallschichten, dielektrische Schichten sowie Schutzschichten tragen. Metalle und dielektrische Schichten dienen u. a. zur Einstellung der Reflektivität und des Wärmehaushalts. Metalle können je nach Laserwellenlänge Gold, Silber, Aluminium u.a. sein. Dielektrische Schichten sind beispielsweise Siliziumdioxid und Siliciumnitrid. Schutzschichten sind, beispielsweise photohärtbare, Lacke, (drucksensitive) Kleberschichten und Schutzfolien.

10

15

Drucksensitive Kleberschichten bestehen hauptsächlich aus Acryklebern. Nitto Denko DA-8320 oder DA-8310, in Patent JP-A 11-273147 offengelegt, können beispielsweise für diesen Zweck verwendet werden.

20

Der optische Datenträger weist beispielsweise folgenden Schichtaufbau auf (vgl. Fig. 1): ein transparentes Substrat (1), gegebenenfalls eine Schutzschicht (2), eine Informationsschicht (3), gegebenenfalls eine Schutzschicht (4), gegebenenfalls eine Kleberschicht (5), eine Abdeckschicht (6).

Vorzugsweise kann der Aufbau des optischen Datenträgers:

25

- ein vorzugsweise transparentes Substrat (1) enthalten, auf dessen Oberfläche mindestens eine mit Licht beschreibbare Informationsschicht (3), die mit Licht, vorzugsweise Laserlicht beschrieben werden kann, gegebenenfalls eine Schutzschicht (4), gegebenenfalls eine Kleberschicht (5), und eine transparente Abdeckschicht (6) aufgebracht sind.

30

- ein vorzugsweise transparentes Substrat (1) enthalten, auf dessen Oberfläche eine Schutzschicht (2), mindestens eine mit Licht, vorzugsweise Laserlicht beschreibbare Informationsschicht (3), gegebenenfalls eine Kleberschicht (5), und eine transparente Abdeckschicht (6) aufgebracht sind.

5

- ein vorzugsweise transparentes Substrat (1) enthalten, auf dessen Oberfläche gegebenenfalls eine Schutzschicht (2), mindestens eine mit Licht, vorzugsweise Laserlicht beschreibbare Informationsschicht (3), gegebenenfalls eine Schutzschicht (4), gegebenenfalls eine Kleberschicht (5), und eine transparente Abdeckschicht (6) aufgebracht sind.

10

- ein vorzugsweise transparentes Substrat (1) enthalten, auf dessen Oberfläche mindestens eine mit Licht, vorzugsweise Laserlicht beschreibbare Informationsschicht (3), gegebenenfalls eine Kleberschicht (5), und eine transparente Abdeckschicht (6) aufgebracht sind.

15

Alternativ weist der optische Datenträger beispielsweise folgenden Schichtaufbau auf (vgl. Fig. 2): ein vorzugsweise transparentes Substrat (11), eine Informationsschicht (12), gegebenenfalls eine Reflexionsschicht (13), gegebenenfalls eine Kleberschicht (14), ein weiteres vorzugsweise transparentes Substrat (15).

20

Alternativ weist der optische Datenträger beispielsweise folgenden Schichtaufbau auf (vgl. Fig. 3): ein vorzugsweise transparentes Substrat (21), eine Informationsschicht (22), gegebenenfalls eine Reflexionsschicht (23), eine Schutzschicht (24).

25

Die Erfindung betrifft weiterhin mit blauem, rotem oder infrarotem Licht, insbesondere Laserlicht, insbesondere infrarotem Laserlicht beschriebene erfindungsgemäße optische Datenträger.

30

Die folgenden Beispiele verdeutlichen den Gegenstand der Erfindung.

Beispiele:

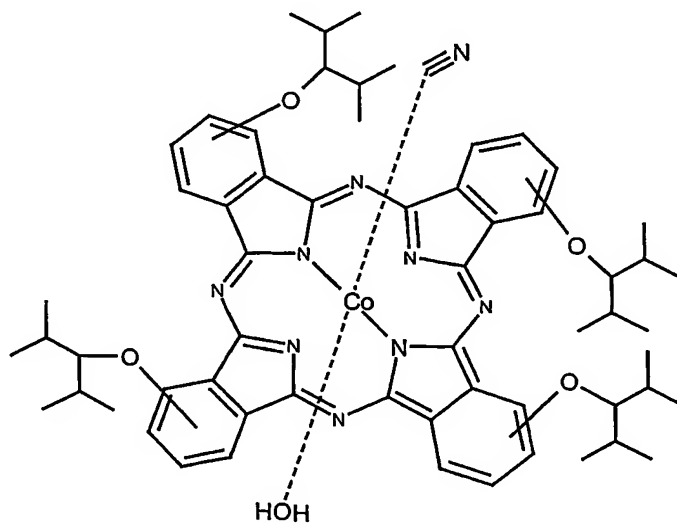
Die folgenden präparativen Beispiele zeigen die Herstellung der erfindungsgemäß zu verwendenden Farbstoffe.

5

Beispiel 1

113.11g Tetra-(2,4-dimethyl-3-pentoxo)-kobaltphthalocyanin (Isomerengemisch) werden mit 15.63g KCN in 1l NMP über Nacht bei RT verrührt. Dann werden 162g Silica Gel zugegeben, 1h nachgerührt und abgesaugt. Die NMP-Lösung wird langsam in eine Mischung von 810g NaCl (P.A., Merck) mit 2.5l Wasser und Eis getropft. Nach 2h Rühren bei RT wird abgesaugt und die Paste 1h bei 40°C in Wasser/Methanol 1:1 ausgerührt. Nach dem Abkühlen wird abgesaugt und bei 30°C im Vakuum getrocknet. Ausbeute: 100.6g Farbstoff der Formel:

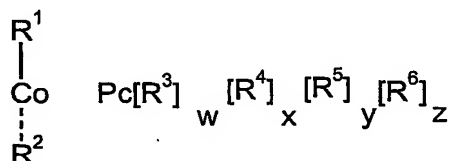
15



Isomerengemisch λ_{\max} 708nm (NMP)

Patentansprüche

1. Optische Datenträger, die in ihrer Informationsschicht wenigstens eine lichtabsorbierende Verbindung enthalten die ein Co(III)-Phthalocyanin ist, wobei das Co-Metallzentrum einen axialen Substituenten R^1 und einen axialen koordinativ gebundenen Liganden R^2 trägt, wobei R^1 für CN, SCN, Halogen, insbesondere Cl, B oder F, Alkoxy, Aryloxy, Arylthio oder Alkylthio steht, und R^2 für keinen Liganden oder für gegebenenfalls substituiertes Amin, Wasser, Alkohol, H_2S , Thioalkohol oder für ein Isonitril steht.
2. Optischer Datenträger enthaltend als lichtabsorbierende Verbindung ein Phthalocyanin der allgemeinen Formel I



worin

CoPc für Kobalt-(III)-Phthalocyanin steht, wobei R^1 ein axialer Substituent und R^2 axialer koordinativ gebundener Ligand, und die Reste R^3 bis R^6 Substituenten des Phthalocyanins entsprechen, worin

R^1 für CN, SCN, Halogen, Alkoxy, Aryloxy, Arylthio oder Alkylthio steht,

R^2 für keinen Liganden oder für $NR^{17}R^{18}R^{19}$, $OR^{10}R^{11}$, $SR^{10}R^{11}$ oder für ein

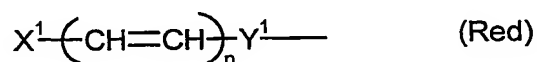
Isonitril der Formel $\ominus \quad \oplus$
 $IC \equiv N - R$ steht,

R^3 , R^4 , R^5 und R^6 unabhängig voneinander für Halogen, Cyano, Nitro, Alkyl, Aryl, Alkylamino, Dialkylamino, Alkoxy, Aryloxy, Arylthio,

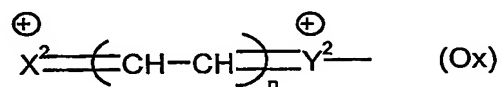
Alkylthio, SO_3H , $\text{SO}_2\text{NR}^7\text{R}^8$, CO_2R^{12} , CONR^7R^8 , NH-COR^{12} oder einen Rest $-(\text{B})_m\text{-D}$ stehen,

B ein Brückenglied aus der Gruppe direkte Bindung, CH_2 , CO , $\text{CH}(\text{Alkyl})$, $\text{C}(\text{Alkyl})_2$, NH , S , O oder $-\text{CH}=\text{CH}-$ bedeutet, wobei $(\text{B})_m$ eine chemisch sinnvolle Kombination von Brückengliedern B bedeutet und m für 1 bis 10 steht, vorzugsweise ist $m = 1$,

D für den monovalenten Rest eines Redoxsystems der Formel



oder



oder für einen Metallocenylrest oder Metallocenylcarbonylrest steht, wobei als Metallzentrum Titan, Mangan, Eisen, Ruthenium oder Osmium in Frage kommt,

X^1 und X^2 unabhängig voneinander für NR^7R^8 , OR^{12} oder SR^{12} steht,

Y^1 für NR^7 , O oder S steht,

Y^2 für NR^7 steht,

n für 1 bis 10 steht und

R^7 und R^{12} unabhängig voneinander für Wasserstoff, Alkyl, Cycloalkyl, Aryl oder Hetaryl stehen oder eine direkte Bindung oder eine Brücke zu

einem der C-Atome der -(CH=CH)_n bzw. -(CH-CH)_n

Kette bilden,

w, x, y und z unabhängig voneinander für 0 bis 4 stehen und $w+x+y+z \leq 12$
sind,

R für Alkyl oder Aryl steht

R^7 und R^8 unabhängig voneinander für Alkylamino, Hydroxyalkylamin,
Dialkylamino, Bishydroxyalkylamino, Arylamino oder R^7 und R^8
gemeinsam mit dem N-Atom, an das sie gebunden sind, einen hetero-
cyclischen 5-, 6- oder 7-gliedrigen Ring bilden, gegebenenfalls unter
Beteiligung weiterer Heteroatome, insbesondere aus der Gruppe O, N
und S, wobei NR^7R^8 insbesondere für Pyrrolidino, Piperidino oder
Morpholino steht, und

R^{10} und R^{11} unabhängig voneinander für Wasserstoff, Alkyl, Aryl oder R^{10}
und R^{11} gemeinsam mit dem O- oder S-Atom, an das sie gebunden
sind, einen aromatischen, quasi-aromatischen, teil- oder perhydrierten
heterocyclischen 5-, 6- oder 7-gliedrigen Ring bilden, gegebenenfalls
unter Beteiligung weiterer Heteroatome, insbesondere aus der Gruppe
O, N und S, stehen

R^{12} für Alkyl, Aryl, Hetaryl oder Wasserstoff steht

R^{17} , R^{18} und R^{19} unabhängig voneinander für Wasserstoff, Alkyl, Aryl,
Hetaryl oder NR^{17} R^{18} R^{19} für einen aromatischen, quasi-
aromatischen, teil- oder perhydrierten heterocyclischen 5-, 6- oder 7-
gliedrigen Ring stehen, gegebenenfalls unter Beteiligung weiterer
Heteroatome, insbesondere aus der Gruppe O, N und S.

3. Optischer Datenträger gemäß Anspruch 2, dadurch gekennzeichnet, dass in der mit Licht beschreibbaren Informationsschicht wenigstens ein Co-Phthalocyanin der Formel I enthalten ist, worin für die Reste R^1 bis R^8 , R , R' , R'' , R^{10} bis R^{12} und R^{17} bis R^{19} :

5

Substituenten mit der Bezeichnung „Alkyl“ C_1 - C_{16} -Alkyl, insbesondere C_1 - C_6 -Alkyl bedeuten, die gegebenenfalls durch Halogen, wie Chlor, Brom, Fluor, Hydroxy, Cyano und/oder C_1 - C_6 -Alkoxy substituiert sind,

10

die Substituenten mit der Bezeichnung „Alkoxy“ C_1 - C_{16} -Alkoxy, insbesondere C_1 - C_6 -Alkoxy bedeuten, die gegebenenfalls durch Halogen, wie Chlor, Brom, Fluor, Hydroxy, Cyano und/oder C_1 - C_6 -Alkyl substituiert sind,

15

Substituenten mit der Bezeichnung „Cycloalkyl“ vorzugsweise C_4 - C_8 -Cycloalkyl, insbesondere C_5 bis C_6 -Cycloalkyl bedeuten, die gegebenenfalls durch Halogen, wie Chlor, Brom oder Fluor, Hydroxy, Cyano und/oder C_1 - C_6 -Alkyl substituiert sind,

20

Substituenten mit der Bezeichnung „Alkenyl“ vorzugsweise C_6 - C_8 -Alkenyl bedeuten, die gegebenenfalls durch Halogen, wie Chlor, Brom oder Fluor, Hydroxy, Cyano und/oder C_1 - C_6 -Alkyl substituiert sind, insbesondere bedeutet Alkenyl Allyl,

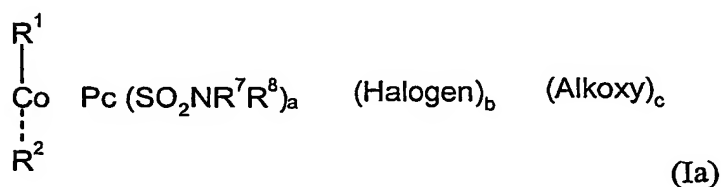
25

Substituenten mit der Bedeutung „Hetaryl“ vorzugsweise für heterocyclische Reste mit 5- bis 7-gliedrigen Ringen, die vorzugsweise Heteroatome aus der Gruppe N, S und/oder O enthalten und gegebenenfalls mit aromatischen Ringen anelliert sind oder gegebenenfalls weitere Substituenten tragen beispielsweise Halogen, Hydroxy, Cyano und/oder Alkyl, wobei besonders bevorzugt sind: Pyridyl, Furyl, Thienyl, Oxazolyl, Thiazolyl, Imidazolyl, Chinolyl, Benzoxazolyl, Benzthiazolyl und Benzimidazolyl,

30

die Substituenten mit der Bezeichnung „Aryl“ C₆-C₁₀-Aryl, vorzugsweise Phenyl oder Naphthyl bedeuten, die gegebenenfalls durch Halogen, wie F, Cl, Hydroxy, C₁-C₆-Alkyl, C₁-C₆-Alkoxy, NO₂ und/oder CN substituiert sind.

- 5 4. Optische Datenträger gemäß Anspruch 1, dadurch gekennzeichnet, dass das Co-Phthalocyanin der Formel Ia entspricht



worin

Halogen für Chlor, Brom oder Fluor steht,

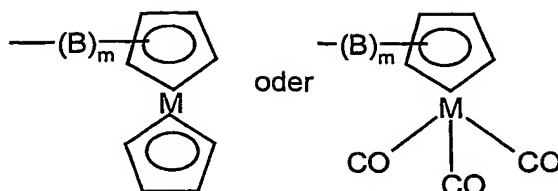
Alkoxy für C₁-C₈-Alkoxy steht, das gegebenenfalls substituiert ist, und
a eine Zahl von 0 bis 4, b eine Zahl von 0 bis 10, c eine Zahl
von 0 bis 8 bedeutet, wobei die Summe aus a, b und c ≤ 12 ist
und

R¹, R², R⁷, R⁸, und CoPc die in Spruch 2 angegebene Bedeutung besitzen.

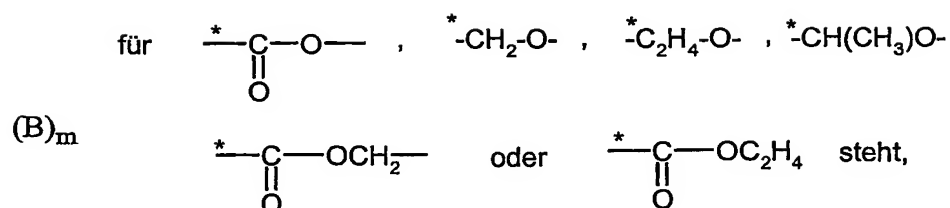
- 20 5. Optische Datenträger gemäß Anspruch 2, dadurch gekennzeichnet, dass in der mit Licht beschreibbaren Informationsschicht wenigstens ein Co-Phthalocyanin der Formel I enthalten ist, worin

R³, R⁴, R⁵ und R⁶ unabhängig voneinander für Chlor, Fluor, Brom, Iod, Cyano, Methyl, Ethyl, Propyl, Isopropyl, Butyl, Isobutyl, tert. Butyl, Pentyl, tert. Amyl, Hydroxyethyl, 3-Dimethylaminopropyl, 3-Diethylaminopropyl, Phenyl, p-tert.-Butylphenyl, p-Methoxyphenyl, Isopropylphenyl, Trifluormethylphenyl, Naphthyl, Methylamino,

Ethylamino, Propylamino, Isopropylamino, Butylamino, Isobutyl-
 amino, tert. Butylamino, Pentylamino, tert. Amylamino, Benzylamino,
 Methylphenylhexylamino, Hydroxyethylamino, Aminopropylamino,
 Aminoethylamino, 3-Dimethylaminopropylamino, 3-Diethylamino-
 propylamino, Diethylaminoethylamino, Dibutylaminopropylamino,
 Morpholinopropylamino, Piperidinopropylamino, Pyrrolidinopropyl-
 amino, Pyrrolidonopropylamino, 3-(Methyl-Hydroxyethylamino)-
 propylamino, Methoxyethylamino, Ethoxyethylamino, Methoxy-
 propylamino, Ethoxypropylamino, Methoxyethoxypropylamino, 3-(2-
 Ethylhexyloxy)propylamino, Isopropoxypropylamino, Dimethyl-
 amino, Diethylamino, Diethanolamino, Dipropylamino, Diiso-
 propylamino, Dibutylamino, Diisobutylamino, Di-tert. butylamino,
 Dipentylamino, Di-tert. amylamino, Bis(2-Ethylhexyl)amino, Bis-
 (aminopropyl)amino, Bis(aminoethyl)amino, Bis(3-Dimethylamino-
 propyl)amino, Bis(3-diethylaminopropyl)amino, Bis(diethylamino-
 ethyl)amino, Bis(dibutylaminopropyl)amino, Di(morpholinopropyl)-
 amino, Di(piperidinopropyl)amino, Di(pyrrolidinopropyl)amino, Di-
 (pyrrolidonopropyl)amino, Bis(3-(methyl-hydroxyethylamino)pro-
 pyl)amino, Dimethoxyethylamino, Diethoxyethylamino, Dimeth-
 oxypropylamino, Diethoxypropylamino, Di(methoxyethoxyethyl)-
 amino, Di(methoxyethoxypropyl)amino, Bis(3-(2-Ethylhexyloxy)-
 propyl)amino, Di(isopropoxyisopropyl)amino, Methoxy, Ethoxy,
 Propyloxy, Isopropoxy, Butyloxy, Isobutyloxy, tert.- Butyloxy,
 Pentyloxy, tert. Amyloxy, Methoxyethoxy, Ethoxyethoxy, Methoxy-
 propyloxy, Ethoxypropyloxy, Methoxyethoxypropyloxy, 3-(2-Ethyl-
 hexyloxy)propyloxy, Phenyl, Methylthio, Ethylthio, Propylthio,
 Isopropylthio, Butylthio, Isobutylthio, tert.-Butylthio, Pentylthio, tert.-
 Amylthio, Methoxyphenyl, Trifluormethylphenyl, Naphthyl, CO_2R^{12} ,
 CONR^7R^8 , NH-COR^{12} , SO_3H , $\text{SO}_2\text{NR}^7\text{R}^8$ oder für einen Rest der
 Formel



worin



wobei der Stern (*), die Anknüpfung mit dem 5-Ring anzeigt,

w, x, y und z unabhängig voneinander für 0 bis 4 stehen und $w+x+y+z \leq 12$ sind,

NR⁷R⁸ für Amino, Methylamino, Ethylamino, Propylamino, Isopropylamino, Butylamino, Isobutylamino, tert. Butylamino, Pentylamino, tert. Amylamino, Benzylamino, Methylphenylhexylamino, 2-Ethyl-1-hexylamino, Hydroxyethylamino, Aminopropylamino, Aminoethylamino, 3-Dimethylaminopropylamino, 3-Diethylaminopropylamino, Morpholinopropylamino, Piperidinopropylamino, Pyrrolidinopropylamino, Pyrrolidonopropylamino, 3-(Methyl-Hydroxyethylamino)propylamino, Methoxyethylamino, Ethoxyethylamino, Methoxypropylamino, Ethoxypropylamino, Methoxyethoxypropylamino, 3-(2-Ethylhexyloxy)propylamino, Isopropoxyisopropylamino, Dimethylamino, Diethylamino, Dipropylamino, Diisopropylamino, Dibutylamino, Diisobutylamino, Di-tert. butylamino, Dipentylamino, Di-tert.

amylamino, Bis(2-Ethylhexyl)amino, Dihydroxyethylamino, Bis(aminopropyl)amino, Bis(aminoethyl)amino, Bis(3-dimethylaminopropyl)amino, Bis(3-diethylaminopropyl)amino, Di(morpholinopropyl)amino, Di(piperidinopropyl)amino, Di(pyrrolidinopropyl)amino, Di(pyrrolidonopropyl)amino, Bis(3-(Methyl-Hydroxyethylamino)propyl)amino, Dimethoxyethylamino, Diethoxyethylamino, Dimethoxypropylamino, Diethoxypropylamino, Di(methoxyethoxypropyl)amino, Bis(3-(2-Ethylhexyloxy)propyl)amino, Di(isopropoxyisopropyl)amino, Anilino, p-Toluidino, p-tert. Butylanilino, p-Anisidino, Isopropylanilino, Naphthylamino stehen oder NR^7R^8 stehen, insbesondere für Pyrrolidino, Piperidino, Piperazino oder Morpholino stehen,

R^{12} für Wasserstoff, Methyl, Ethyl, Propyl, Isopropyl, Butyl, Isobutyl, tert.-Butyl, Pentyl, tert.-Amyl, Phenyl, p-tert.-Butylphenyl, p-Methoxyphenyl, Isopropylphenyl, p-Trifluormethylphenyl, Cyano-phenyl, Naphthyl, 4-Pyridinyl, 2-Pyridinyl, 2-Chinolinyl, 2-Pyrrolyl oder 2-Indolyl steht,

$\text{NR}^{17}\text{R}^{18}\text{R}^{19}$ für Amoniak, Methylamin, Ethylamin, Propylamin, Isopropylamin, Butylamin, Isobutylamin, tert. Butylamin, Pentylamin, tert. Amylamin, Benzylamin, Methylphenylhexylamin, 2-Ethyl-1-hexylamin, Hydroxyethylamin, Aminopropylamin, Aminoethylamin, 3-Dimethylaminopropylamin, 3-Diethylaminopropylamin, Morpholinopropylamin, Piperidinopropylamin, Pyrrolidinopropylamin, Pyrrolidonopropylamin, 3-(Methyl-Hydroxyethylamino)propylamin, Methoxyethylamin, Ethoxyethylamino, Methoxypropylamin, Ethoxypropylamin, Methoxyethoxypropylamin, 3-(2-Ethylhexyloxy)propylamin, Isopropoxyisopropylamin, Dimethylamin, Diethylamin, Dipropylamin, Diisopropylamin, Dibutylamin, Diisobutylamin, Di-tert. butylamin, Dipentylamin, Di-tert. Amylamin, Bis(2-

Ethylhexyl)amin, Dihydroxyethylamin, Bis(aminopropyl)amin, Bis-
 (aminoethyl)amin, Bis(3-Dimethylaminopropyl)amin, Bis(3-Diethyl-
 aminopropyl)amin, Di(morpholinopropyl)amin, Di(piperidinopro-
 pyl)amin, Di(pyrrolidinopropyl)amin, Di(pyrrolidonopropyl)amin,
 5 Bis(3-(Methyl-Hydroxyethylamino)propyl)amin, Dimethoxyethyl-
 amin, Diethoxyethylamin, Dimethoxypropylamin, Diethoxy-
 propylamin, Di(methoxyethoxypropyl)amin, Bis(3-(2-Ethylhexyl-
 oxy)propyl)amino, Di(isopropoxyisopropyl)amin, Trimethylamin,
 Triethylamin, Tripropylamin, Triisopropylamin, Tributylamin, Triiso-
 butylamin, Tri-tert. butylamin, Tripentylamin, Tri-tert. Amylamin,
 10 Tris(2-Ethylhexyl)amin, Trihydroxyethylamin, Tris(amino-
 propyl)amin, Tris(aminoethyl)amin, Tris(3-Dimethylamino-
 propyl)amin, Tris(3-Diethylaminopropyl)amin, Tri(morpholino-
 propyl)amin, Tri(piperidinopropyl)amin, Tri(pyrrolidino-
 15 propyl)amin, Tri(pyrrolidonopropyl)amin, Tris(3-(Methyl-Hydroxy-
 ethylamino)propyl)amin, Trimethoxyethylamin, Triethoxyethylamin,
 Trimethoxypropylamin, Triethoxypropylamin, Tri(methoxy-
 ethoxypropyl)amin, Tris(3-(2-Ethylhexyloxy)propyl)amino, Tri(iso-
 propoxyisopropyl)amin, Anilin, p-Toluidin, p-tert. Butylanilin, p-
 20 Anisidin, Isopropylanilin, Naphtylamin Pyridin, Pyridazin, Pyrimidin,
 Pyrazin, Triazin, Oxazin, Pyrrol, Pyrazol, Imidazol, Chinolin,
 Pyrrolidin, Piperidin, Piperazin oder Morpholin stehen,

OR¹⁰R¹¹ für Wasser, Methanol, Ethanol, Propanol, Isopropanol, Butanol,
 25 Isobutanol, tert. Butanol, Pentanol, tert. Amylalkohol, 3-(2,4-
 Dimethyl)-pentanol, Methoxyethanol, Ethoxyethanol, Methoxy-
 propanol, Ethoxypropanol, Methoxyethoxypropanol, 3-(2-
 Ethylhexyloxy)propanol, Diacetonalcohol, Phenol, Tetrahydrofuran,
 Furan oder Oxazol stehen

SR¹⁰R¹¹ für Schwefelwasserstoff, Methylthiol, Ethylthiol, Propylthiol, Isopropylthiol, Butylthiol, Isobutylthiol, tert. Buylthiol, Pentylthiol, tert. Amylthiol, 3-(2,4-Dimethyl)-pentylthiol, Methoxyethylthiol, Ethoxyethylthiol, Methoxypropylthiol, Ethoxypropylthiol, Methoxyethoxypropylthiol, 3-(2-Ethylhexyloxy)propylthiol, Diacetonathiol, Thiophenol, Tetrahydrothiofuran, Thiofuran oder Oxathiazol stehen

wobei

die Alkyl-, Alkoxy-, Aryl- und heterocyclischen Reste gegebenenfalls weitere Reste wie Alkyl, Halogen, Hydroxy, Hydroxyalkyl, Amino, Alkylamino, Dialkylamino, Nitro, Cyano, CO-NH₂, Alkoxy, Alkoxycarbonyl, Morpholino, Piperidino, Pyrrolidino, Pyrrolidono, Trialkylsilyl, Trialkylsiloxy oder Phenyl tragen können, die Alkyl- und/oder Alkoxyreste gesättigt, ungesättigt, geradkettig oder verzweigt sein können, die Alkylreste teil- oder perhalogeniert sein können, die Alkyl- und/oder Alkoxyreste ethoxyliert oder propoxyliert oder silyliert sein können, benachbarte Alkyl und/oder Alkoxyreste an Aryl- oder heterocyclischen Resten gemeinsam eine drei- oder viergliedrige Brücke ausbilden können.

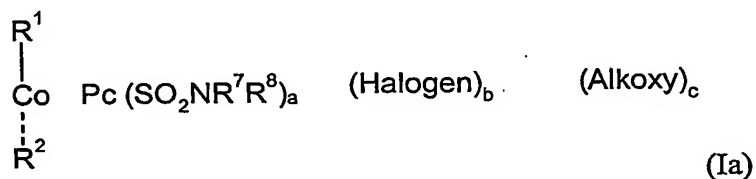
6. Optische Datenträger gemäß Anspruch 2, dadurch gekennzeichnet, dass die mit Licht beschreibbare Informationsschicht zusätzlich ein von (I) verschiedenes metallhaltiges oder metallfreies Phthalocyanin enthält, wobei das Zentralatom ausgewählt wird aus den Gruppen: Si, Zn, Al, Cu, Pd, Pt, Au und Ag, insbesondere Cu oder Pd.

7. Optische Datenträger mit einer beschriebenen Informationsschicht, erhältlich dadurch, dass der optische Datenträger gemäß Anspruch 1 mit Licht einer Wellenlänge von 700 bis 830 nm, vorzugsweise von 750 - 800 nm, beschrieben wurde.

8. Ein Verfahren zur Herstellung der erfindungsgemäßen optischen Datenspeicher gemäß Anspruch 1, dadurch gekennzeichnet, dass man ein Co(III)-Phthalocyanin, wobei das Co-Metallzentrum einen axialen Substituenten R¹ und einen axialen koordiniert gebundenen Liganden R² trägt, wobei R¹ für CN, SCN, Halogen, insbesondere Cl, B oder F, Alkoxy, Aryloxy, Arylthio oder Alkylthio steht, und R² für keinen Liganden oder für gegebenenfalls substituiertes Amin, Wasser, Alkohol, H₂S, Thioalkohol oder für ein Isonitril steht, als lichtabsorbierende Verbindung auf das Substrat des optischen Datenträgers aufträgt.

9. Verwendung von Co-Phthalocyaninen der Formel (I) als lichtabsorbierende Verbindungen in der mit Licht beschreibbaren Informationsschicht von optischen Datenspeichern.

10. Verbindungen der Formel Ia



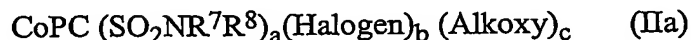
worin

Halogen für Chlor, Brom oder Fluor steht,

Alkoxy für C₁-C₈-Alkoxy steht, das gegebenenfalls substituiert ist, und a eine Zahl von 0 bis 4, b eine Zahl von 0 bis 10, c eine Zahl von 0 bis 8 bedeutet, wobei die Summe aus a, b und c ≤ 12 ist und

R¹, R², R⁷, R⁸ und CoPc die die in Anspruch 2 angegebene Bedeutung besitzen.

11. Verfahren zur Herstellung der Verbindung gemäß Anspruch 10, dadurch gekennzeichnet, dass man gegebenenfalls substituentes Co-Phthalocyanin der Formel (IIa)

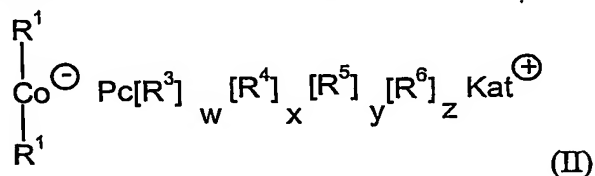


oxidiert, anschließend mit KatCN, KatSCN, Kathalogenid, Katalkoxy oder Katalkylthio umsetzt und gegebenenfalls weiter mit $\text{NR}^{17}\text{R}^{18}\text{R}^{19}$, $\text{OR}^{10}\text{R}^{11}$,

$\text{SR}^{10}\text{R}^{11}$ oder einem Isonitril der Formel $\text{IC}\equiv\text{N}-\text{R}$ bei 30-100°C umsetzt $\ominus \oplus$
 R^{17} , R^{18} , R^{19} , R^{10} , R^{11} , und R die in Anspruch 2 angegebene Bedeutung besitzen und Kat für Lithiumkation, Natriumkation, Kaliumkation, Tetrabutylammoniumkation, Tetrapropylammoniumkation, Tetraethylammoniumkation, Tetramethylammoniumkation, Triethyloxoniumkation, Triphenylcarboniumkation, Diphenyliodoniumkation, N-Ethylpyridiniumkation oder Ferrocenkation steht.

12. Mischungen enthaltend

- a) ein Co(III)-Phthalocyanin der Formel I mit einem axialen Substituenten R^1 , und einem axialen Liganden R^2 ,
 c) ein von a) verschiedenes Phthalocyanin, der Formel II



wobei R^1 , R^3 , R^4 , R^5 , R^6 w, x, y, z und CoPc die in Anspruch 2 angegebene Bedeutung besitzen und

Kat+ für Lithiumkation, Natriumkation, Kaliumkation, Tetrabutylammoniumkation, Tetrapropylammoniumkation, Tetraethylammoniumka-

tion, Tetramethylammoniumkation, Triethyloxoniumkation, Triphenylcarboniumkation, Diphenyliodoniumkation, N-Ethylpyridiniumkation oder Ferrocenkation steht,

- 5 13. Mischung enthaltend wenigstens 50 Gew.% eines Co(III)-Phthalocyanins der Formel I mit einem axialen Substituenten R^1 und einem koordinativ gebundenen Liganden R^2 , wobei R^1 und R^2 die in Anspruch 2 angegebene Bedeutung besitzen.

Optische Datenspeicher enthaltend ein Co- Phthalocyanin mit einem axialen Substituenten und einem axialen Liganden in der mit Licht beschreibbaren Informationsschicht

Z u s a m m e n f a s s u n g

Optische Datenträger, die in ihrer Informationsschicht wenigstens eine lichtabsorbierende Verbindung enthalten die ein Co(III)-Phthalocyanin ist, wobei das Co-Metallzentrum einen axialen Substituenten R^1 und einen axialen koordinativ gebundenen Liganden R^2 trägt, wobei R^1 für CN, SCN, Halogen, insbesondere Cl, Br oder F, Alkoxy, Aryloxy, Arylthio oder Alkylthio steht, und R^2 für keinen Liganden oder für gegebenenfalls substituiertes Amin, Wasser, Alkohol, H_2S , Thioalkohol oder für ein Isonitril steht.

Fig. 1

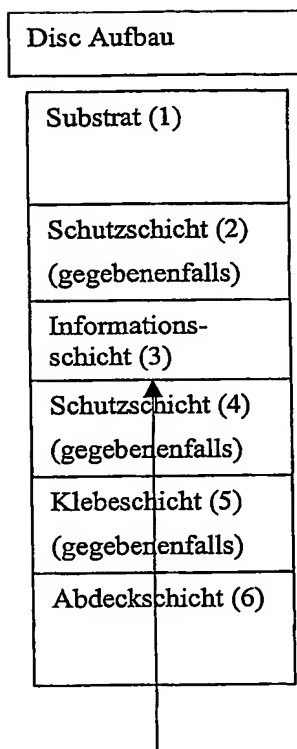


Fig. 2

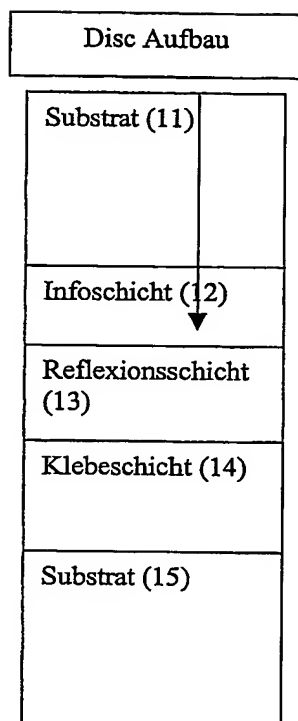


Fig. 3

